

УДК 628.165

DOI: 10.30838/UJCEA.0333.270526.122.1249

## ХІМІЧНИЙ СКЛАД ТА МОЛЕКУЛЯРНІ МЕХАНІЗМИ ДІЇ АНТИСКАЛАНТІВ ДЛЯ СИСТЕМ ЗВОРОТНОГО ОСМОСУ : ФУНДАМЕНТАЛЬНІ АСПЕКТИ

НЕЧИТАЙЛО М. П.<sup>1</sup>, канд. техн. наук, доц.,  
НАГОРНА О. К.<sup>2</sup>, канд. техн. наук, доц.,  
НЕСТЕРОВА О. В.<sup>3\*</sup>, канд. техн. наук, доц.,  
НЕЧИТАЙЛО М. М.<sup>4</sup>, студ.,  
ЧЕРНОВА Є. О.<sup>5</sup>, студ.

<sup>1</sup> Кафедра водопостачання, водовідведення та гідравліки, Український державний університет науки і технологій, ННІ «Придніпровська державна академія будівництва та архітектури», вул. Архітектора Олега Петрова, 24-а, 49005, Дніпро, Україна, тел. +38 (056) 756-34-74, e-mail: [n\\_np@ukr.net](mailto:n_np@ukr.net), <https://orcid.org/0000-0001-5963-0590>

<sup>2</sup> Кафедра водопостачання, водовідведення та гідравліки, Український державний університет науки і технологій, ННІ «Придніпровська державна академія будівництва та архітектури», вул. Архітектора Олега Петрова, 24-а, 49005, Дніпро, Україна, тел. +38 (056) 756-34-74, e-mail: [nahorna.olena@pdaba.edu.ua](mailto:nahorna.olena@pdaba.edu.ua), <https://orcid.org/0000-0003-4027-9336>

<sup>3\*</sup> Кафедра водопостачання, водовідведення та гідравліки, Український державний університет науки і технологій, ННІ «Придніпровська державна академія будівництва та архітектури», вул. Архітектора Олега Петрова, 24-а, 49005, Дніпро, Україна, тел. +38 (056) 756-34-74, e-mail: [melenanesterenko@gmail.com](mailto:melenanesterenko@gmail.com), <https://orcid.org/0000-0003-1035-6572>

<sup>4</sup> Кафедра водопостачання, водовідведення та гідравліки, Український державний університет науки і технологій, ННІ «Придніпровська державна академія будівництва та архітектури», вул. Архітектора Олега Петрова, 24-а, 49005, Дніпро, Україна, тел. +38 (056) 756-34-74, e-mail: [n.m.n.margo@gmail.com](mailto:n.m.n.margo@gmail.com), <https://orcid.org/0009-0008-4040-6888>

<sup>5</sup> Кафедра водопостачання, водовідведення та гідравліки, Український державний університет науки і технологій, ННІ «Придніпровська державна академія будівництва та архітектури», вул. Архітектора Олега Петрова, 24-а, 49005, Дніпро, Україна, тел. +38 (056) 756-34-74, e-mail: [sale1@fabrikaosnova.com.ua](mailto:sale1@fabrikaosnova.com.ua), <https://orcid.org/0009-0003-1833-9555>

**Анотація. Постановка проблеми.** Стрімкий розвиток технологій зворотного осмосу у системах водопідготовки та опріснення води підвищує актуальність ефективних методів запобігання накипоутворенню. Мінеральні відкладення, що формуються на поверхні напівпроникних мембран, призводять до зниження продуктивності систем на 10–15 % протягом перших шести місяців експлуатації, збільшення гідравлічного опору, погіршення якості пермеату, а також до зростання енергоспоживання на 15–30 % та експлуатаційних витрат. Традиційна парадигма прямої адсорбції антискалантів на поверхні кристалів сьогодні переглядається у зв'язку з відкриттям ключової ролі наночастинок як центрів гетерогенної нуклеації, що пояснює надзвичайно низькі робочі концентрації інгібіторів (0,5–20 мг/л). **Мета дослідження.** Метою даної роботи є встановлення взаємозв'язку між хімічною будовою антискалантів і механізмами їх інгібуючої дії у системах зворотного осмосу. Особливу увагу приділено взаємодії функціональних груп фосфонатних і полімерних антискалантів із зародками кристалів та наночастинок, які виконують роль центрів гетерогенної нуклеації. Отримані результати мають створити теоретичну основу для раціонального дизайну антискалантів наступного покоління. **Результати.** У роботі проаналізовано структурні та фізико-хімічні властивості фосфонатних антискалантів, зокрема РВТС, АТМР та НЕДР, а також полімерних антискалантів на основі поліакрилової кислоти (РАА), для якої виявлено три режими інгібуючої дії залежно від молекулярної маси (пороговий механізм при 2000–3000 Да та інші режими для більших мас). Встановлено, що ефективність фосфонатних інгібіторів визначається оптимальним поєднанням хелатуючих властивостей, адсорбційної здатності та молекулярної стабільності; критичною є відстань між функціональними групами 2,5–4,0 Å, що відповідає геометрії кристалічної решітки кальциту. Показано, що ключовим механізмом дії антискалантів є не пряма адсорбція на поверхні кристалів, а селективне блокування наночастинок розміром 10–100 нм, які слугують центрами гетерогенної нуклеації; для ефективного інгібування достатньо заблокувати лише 5–10 % таких наночастинок. Розглянуто математичні моделі, що описують термодинамічні та кінетичні аспекти інгібування кристалізації (модифіковане рівняння Гіббса – Томсона та рівняння Кабрери – Вермілі). Отримані результати створюють теоретичну основу для розроблення антискалантів нового покоління та оптимізації їх застосування у системах зворотного осмосу.

**Ключові слова:** зворотний осмос; антискаланти; фосфонати; механізми інгібування; нуклеація; кристалізація; наночастинок; гетерогенна нуклеація

## CHEMICAL COMPOSITION AND MOLECULAR MECHANISMS OF ACTION OF ANTISCALANTS FOR REVERSE OSMOSIS SYSTEMS : FUNDAMENTAL ASPECTS

NECHYTAILO M.P.<sup>1</sup>, *Cand. Sc. (Tech.), Assoc. Prof.*,  
NAHORNA O.K.<sup>2</sup>, *Cand. Sc. (Tech.), Assoc. Prof.*,  
NESTEROVA O.V.<sup>3\*</sup>, *Cand. Sc. (Tech.), Assoc. Prof.*,  
NECHYTAILO M.M.<sup>4</sup>, *Stud.*,  
CHERNOVA Yev.O.<sup>5</sup>, *Stud.*

<sup>1</sup> Department of Water Supply, Wastewater Engineering and Hydraulics, Ukrainian State University of Science and Technologies, ESI "Prydniprovsk State Academy of Civil Engineering and Architecture", 24-a, Architect Oleh Petrov St., Dnipro, 49005, Ukraine, tel. +38 (056) 756-34-74, e-mail: [n\\_np@ukr.net](mailto:n_np@ukr.net), <https://orcid.org/0000-0001-5963-0590>

<sup>2</sup> Department of Water Supply, Wastewater Engineering and Hydraulics, Ukrainian State University of Science and Technologies, ESI "Prydniprovsk State Academy of Civil Engineering and Architecture", 24-a, Architect Oleh Petrov St., Dnipro, 49005, Ukraine, tel. +38 (056) 756-34-74, e-mail: [nahorna.olena@pdaba.edu.ua](mailto:nahorna.olena@pdaba.edu.ua), <https://orcid.org/0000-0003-4027-9336>

<sup>3\*</sup> Department of Water Supply, Wastewater Engineering and Hydraulics, Ukrainian State University of Science and Technologies, ESI "Prydniprovsk State Academy of Civil Engineering and Architecture", 24-a, Architect Oleh Petrov St., Dnipro, 49005, Ukraine, tel. +38 (056) 756-34-74, e-mail: [melenanesterenko@gmail.com](mailto:melenanesterenko@gmail.com), <https://orcid.org/0000-0003-1035-6572>

<sup>4</sup> Department of Water Supply, Wastewater Engineering and Hydraulics, Ukrainian State University of Science and Technologies, ESI "Prydniprovsk State Academy of Civil Engineering and Architecture", 24-a, Architect Oleh Petrov St., Dnipro, 49005, Ukraine, tel. +38 (056) 756-34-74, e-mail: [n.m.n.margo@gmail.com](mailto:n.m.n.margo@gmail.com), <https://orcid.org/0009-0008-4040-6888>

<sup>5</sup> Department of Water Supply, Wastewater Engineering and Hydraulics, Ukrainian State University of Science and Technologies, ESI "Prydniprovsk State Academy of Civil Engineering and Architecture", 24-a, Architect Oleh Petrov St., Dnipro, 49005, Ukraine, tel. +38 (056) 756-34-74, e-mail: [sale1@fabrikaosnova.com.ua](mailto:sale1@fabrikaosnova.com.ua), <https://orcid.org/0009-0003-1833-9555>

**Abstract. Problem Statement.** The rapid development of reverse osmosis technologies in water treatment and desalination systems increases the relevance of effective methods for preventing scale formation. Mineral deposits formed on the surface of semi-permeable membranes lead to a 10–15 % reduction in system productivity within the first six months of operation, increased hydraulic resistance, deterioration of permeate quality, as well as a 15–30 % increase in energy consumption and operating costs. The traditional paradigm of direct antiscalant adsorption on crystal surfaces is currently being revised in connection with the discovery of the key role of nanoparticles as centers of heterogeneous nucleation, which explains the extremely low operating concentrations of inhibitors (0.5–20 mg/L). **Purpose of the study.** The purpose of this work is to establish the relationship between the chemical structure of antiscalants and the mechanisms of their inhibitory action in reverse osmosis systems. Special attention is paid to the interaction of functional groups of phosphonate and polymeric antiscalants with crystal nuclei and nanoparticles, which serve as centers of heterogeneous nucleation. The obtained results are intended to create a theoretical basis for the rational design of next-generation antiscalants. **Results.** The structural and physicochemical properties of phosphonate antiscalants, in particular PBTC, ATMP, and HEDP, as well as polymeric antiscalants based on polyacrylic acid (PAA), have been analyzed; for PAA, three modes of inhibitory action depending on molecular weight have been identified (threshold mechanism at 2000–3000 Da and other modes for higher masses). It has been established that the effectiveness of phosphonate inhibitors is determined by the optimal combination of chelating properties, adsorption capacity, and molecular stability; the critical distance between functional groups is 2.5–4.0 Å, which corresponds to the geometry of the calcite crystal lattice. It has been shown that the key mechanism of antiscalant action is not direct adsorption on crystal surfaces, but selective blocking of nanoparticles with a size of 10–100 nm, which serve as centers of heterogeneous nucleation; for effective inhibition, it is sufficient to block only 5–10 % of such nanoparticles. Mathematical models describing the thermodynamic and kinetic aspects of crystallization inhibition (modified Gibbs –Thomson equation and Cabrera – Vermilyea equation) have been considered. The obtained results create a theoretical basis for the development of new-generation antiscalants and optimization of their application in reverse osmosis systems.

**Keywords:** *reverse osmosis; antiscalants; phosphonates; inhibition mechanisms; nucleation; crystallization; nanoparticles; heterogeneous nucleation*

**Постановка проблеми.** Глобальне зростання потужностей систем зворотного осмосу, яке досягло 97,2 млн м<sup>3</sup>/добу у 2020 році з прогнозованим зростанням до 140 млн м<sup>3</sup>/добу до 2030 року, ставить нові

виклики перед технологіями водопідготовки [1]. Центральною проблемою залишається утворення мінеральних відкладень на поверхні напівпроникних мембран, що призводить до зниження продуктивності

систем на 10-15 % протягом перших шести місяців експлуатації та збільшення енергоспоживання на 15-30 % [2].

Протягом десятиліть вважалося, що антискаланти працюють через пряму адсорбцію на поверхні кристалів, які формуються. Однак ця парадигма не могла адекватно пояснити надзвичайно низькі робочі концентрації інгібіторів, які часто становлять лише 0,5-20 мг/л. Революційне дослідження групи Попова, опубліковане у 2024 році в журналі *Crystals*, кардинально змінило наше розуміння процесу [3]. Використовуючи флуоресцентно-мічені молекули антискалантів, дослідники виявили, що основний механізм дії полягає не в прямій взаємодії з кристалами, а в блокуванні наночастинок розміром 10-100 нм, які слугують центрами гетерогенної нуклеації.

Це відкриття має фундаментальне значення для розвитку галузі з кількох причин. По-перше, воно нарешті пояснює довготривалу загадку надзвичайної ефективності антискалантів при мінімальних концентраціях – блокування лише кількох відсотків наночастинок ( $\sim 10^6$  частинок/мл навіть у деіонізованій воді) достатньо для запобігання накипоутворенню. По-друге, відкриває шлях до створення принципово нових класів інгібіторів, спеціально розроблених для взаємодії з наночастинами, а не з поверхнею кристалів. По-третє, дозволяє переосмислити стратегії дозування та оптимізації процесів водопідготовки, зосередивши увагу на контролі наночастинок у вихідній воді.

**Мета дослідження** - встановлення чіткого взаємозв'язку між хімічною будовою антискалантів та механізмом їх інгібувальної дії в системах зворотного осмосу. Основну увагу зосереджено на аналізі того, як саме функціональні групи реагентів взаємодіють із зародками кристалів на молекулярному рівні. Отримані результати дозволять науково обґрунтувати підбір інгібіторів для подовження терміну служби мембран та оптимізації витрат на експлуатацію.

**Виклад основного матеріалу. Хімічна структура антискалантів як основа їх**

**функціональності.** Взаємозв'язок між молекулярною архітектурою та функціональними властивостями антискалантів являє собою складну систему, де кожен структурний елемент вносить специфічний внесок у загальну ефективність. Розуміння цих взаємозв'язків критично важливе для раціонального дизайну нових молекул з покращеними характеристиками.

#### **Фосфонатні антискаланти.**

Фосфонатні сполуки, які займають понад 45 % світового ринку антискалантів, завдячують своїм успіхом унікальній комбінації хімічної стабільності та хелатуючої здатності. На відміну від поліфосфатів, які швидко гідролізуються у водних розчинах (період напіврозпаду менше 24 годин), фосфонати містять міцний C-P зв'язок з енергією дисоціації 272 кДж/моль, що забезпечує їх стабільність навіть при підвищених температурах [4].

Розглянемо 2-фосфобутан-1,2,4-трикарбонову кислоту (РВТС) як модельну сполуку для розуміння структурно-функціональних залежностей. Молекула РВТС містить одну фосфонову та три карбоксильні групи, розташовані таким чином, що створюють оптимальну геометрію для утворення хелатних комплексів з іонами лужноземельних металів. Дослідження методом рентгеноструктурного аналізу показали, що відстань між функціональними групами становить 2,8-3,2 Å, що відповідає відстані між іонами кальцію в кристалічній решітці кальциту [5].

Термічна стабільність РВТС зберігається до 212°C згідно з даними термогравіметричного аналізу, що робить цю сполуку придатною для використання в системах з підвищеною температурою. Константа стабільності комплексу РВТС з  $\text{Ca}^{2+}$  за температури 25°C та іонної сили 0,1 М становить:

$$\log K = 5,85 \pm 0,12, \quad (1)$$

де  $K$  – константа стабільності комплексу  $[ML]/([M][L])$ .

Амінотриметиленфосфонова кислота (АТМР) демонструє дещо інший механізм дії завдяки наявності центрального атома азоту.

Квантово-хімічні розрахунки методом DFT на рівні B3LYP/6-311++G (d, p) показали, що електронна густина на атомі азоту створює додатковий центр координації, що дозволяє АТМР утворювати більш стабільні комплекси порівняно з НЕДР [6]. Енергія зв'язування АТМР з поверхнею кальциту становить:

$$E_{ads} = -156,3 \text{ кДж/моль}, \quad (2)$$

що на 10 % вище, ніж для НЕДР (-142,7 кДж/моль).

### **Полімерні антискаланти.**

Представляють принципово інший підхід до інгібування накипоутворення. Поліакрилова кислота (РАА), попри простоту своєї хімічної структури, демонструє складну залежність ефективності від молекулярної маси. Нещодавні дослідження з використанням гель-проникної хроматографії з мультикутовим детектором розсіювання світла виявили три різні режими дії залежно від розміру макромолекул [7].

При молекулярній масі 2000–3000 Да домінує пороговий механізм інгібування. Невеликі молекули здатні швидко дифундувати до поверхні зародків кристалізації зі швидкістю, що описується рівнянням Стокса-Ейнштейна:

$$D = \frac{kB \cdot T}{6\pi \cdot \eta \cdot Rh}, \quad (3)$$

де  $D$  – коефіцієнт дифузії, м<sup>2</sup>/с;  $kB$  – стала Больцмана, Дж/К,  $kB = 1,38 \times 10^{-23}$  Дж/К;  $T$  – температура, К;  $\eta$  – в'язкість середовища, Па·с;  $Rh$  – гідродинамічний радіус молекули, м.

Для РАА з молекулярною масою 2500 Да,  $Rh = 1,8$  нм, що дає коефіцієнт дифузії  $1,2 \times 10^{-10}$  м<sup>2</sup>/с при 25°C. Це забезпечує швидке досягнення поверхні критичних зародків розміром 2-5 нм за час менше 1 мс.

**Революційний механізм блокування наночастинок.** Відкриття механізму блокування наночастинок-центрів нуклеації представляє парадигматичний зсув у розумінні дії антискалантів. Традиційна теорія передбачала, що інгібітори адсорбуються безпосередньо на поверхні

кристалів, сповільнюючи їх ріст. Однак експерименти з флуоресцентно-міченими антискалантами показали зовсім іншу картину [3].

Дослідження виявило, що навіть у надчистій деіонізованій воді присутні більше мільйона наночастинок на мілілітр, переважно оксиди та гідроксиди заліза розміром 10–100 нм. Ці частинки служать центрами гетерогенної нуклеації, знижуючи енергетичний бар'єр утворення критичного зародка. Класична теорія нуклеації описує цей процес рівнянням:

$$\Delta G_{zet} = \Delta G_{zom} \cdot f(\theta), \quad (4)$$

де  $\Delta G_{zet}$  та  $\Delta G_{zom}$  – енергії активації для гетерогенної та гомогенної нуклеації відповідно, кДж/моль;  $f(\theta)$  – функція змочування ( $0 < f(\theta) < 1$ ).

Для типових наночастинок оксиду заліза  $f(\theta) \approx 0,1 - 0,3$ , що означає зниження енергетичного бар'єра на 70–90 %. Антискаланти селективно адсорбуються на цих наночастинках, блокуючи їх функцію як центрів нуклеації. Критично важливо, що для ефективного інгібування достатньо заблокувати лише 5–10 % наночастинок, оскільки це підвищує енергетичний бар'єр нуклеації до рівня, при якому спонтанне утворення кристалів стає термодинамічно не вигідним.

**Математичне моделювання процесів інгібування.** Математичне моделювання дозволяє прогнозувати ефективність антискалантів та оптимізувати їх дозування. Сучасні моделі враховують як термодинамічні, так і кінетичні аспекти процесу кристалізації.

**Термодинамічний підхід.** Термодинамічний потенціал утворення критичного зародка описується модифікованим рівнянням Гіббса-Томсона:

$$\Delta G^* = \frac{16\pi \cdot \sigma^3 V_m^2}{3 \cdot (R \cdot T \cdot \ln S)^2}, \quad (5)$$

де  $\sigma$  – поверхневий натяг на межі кристал-розчин, Дж/м<sup>2</sup> (для  $CaCO_3$   $\sigma =$

$= 0,040 \text{ Дж/м}^2$ ;  $V_m$  – молярний об'єм кристалічної фази,  $\text{см}^3/\text{моль}$  ( $36,9 \text{ см}^3/\text{моль}$  для кальциту);  $R$  – універсальна газова стала,  $\text{Дж/моль}\cdot\text{К}$ ,  $R = 8,314 \text{ Дж/моль}\cdot\text{К}$ ;  $T$  – абсолютна температура,  $\text{К}$ ;  $S$  – ступінь пересичення.

Присутність антискалантів модифікує цей вираз через зміну ефективного поверхневого натягу:

$$\sigma_{ef} = \sigma_0 \cdot \left( 1 + \frac{K_{ads} \cdot [I]}{K_m} \right), \quad (6)$$

де  $\sigma_0$  – поверхневий натяг без інгібітору,  $\text{Дж/м}^2$ ;  $K_{ads}$  – константа адсорбції антискаланту,  $\text{л/моль}$ ;  $[I]$  – концентрація інгібітору,  $\text{моль/л}$ ;  $K_m$  – константа Міхаеліса,  $\text{моль/л}$ .

**Кінетична модель.** Швидкість росту кристалів у присутності антискаланту описується модифікованим рівнянням Кабрери-Вермілі, яке враховує блокування активних центрів росту (7):

$$v = v_0 \cdot \left[ (S-1) - \frac{2\sigma \cdot \Omega}{k \cdot T \cdot \rho} \right] \cdot \left[ 1 - \exp\left( \frac{-K_a \cdot [I]}{[I]_0} \right) \right],$$

де  $v_0$  – швидкість росту без інгібітору,  $\text{м/с}$ ;  $\Omega$  – об'єм молекули в кристалі,  $\text{м}^3$ , ( $\Omega = 6,13 \times 10^{-29} \text{ м}^3$  для  $\text{CaCO}_3$ );  $k$  – стала Больцмана;  $\rho$  – відстань між адсорбованими молекулами інгібітору,  $\text{м}$ ;  $K_a$  – константа

адсорбції антискаланту, що характеризує спорідненість інгібітору до поверхні кристала,  $\text{л/моль}$ ;  $[I]_0$  – порогова концентрація,  $\text{мг/л}$ .

Експериментальні дані показують, що для HEDP при  $25^\circ\text{C}$  та  $\text{pH}=8,0$ ,  $K_a = 2,3 \times 10^4 \text{ л/моль}$ ,  $[I]_0 = 0,5 \text{ мг/л}$  [8].

## Висновки

Проведений аналіз хімічної структури та механізмів дії антискалантів дозволяє сформулювати наступні висновки:

1. Ефективність фосфонатних антискалантів визначається оптимальним поєднанням хелатуючих властивостей та здатності до адсорбції на наночастинках, при цьому критичною є відстань між функціональними групами  $2,5\text{-}4,0 \text{ \AA}$ .

2. Революційне відкриття механізму блокування наночастинок – центрів нуклеації – фундаментально змінює підходи до розробки нових антискалантів та стратегій їх застосування.

3. Математичні моделі, що враховують гетерогенну нуклеацію, дозволяють точніше прогнозувати ефективність інгібування та оптимізувати дозування.

Отримані результати створюють теоретичну основу для раціонального дизайну антискалантів наступного покоління з покращеними характеристиками та розробки оптимальних режимів їх застосування в системах зворотного осмосу.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Karabelas A. J., Mitrouli S. T., Kostoglou M. Scaling in reverse osmosis desalination plants : A perspective focusing on development of comprehensive simulation tools. *Desalination*. 2024. Vol. 474. Article 114193. DOI: 10.1016/j.desal.2019.114193.
2. Antony A., Low J. H., Gray S. et al. Scale formation and control in high pressure membrane water treatment systems : a review. *Journal of Membrane Science*. 2011. Vol. 383, № 1-2. Pp. 1-16. DOI: 10.1016/j.memsci.2011.08.054.
3. Popov K., Vainer Y., Silaev G. et al. Potential nano/microcenters of crystal nucleation in reagent-grade purity solvents and their differentiation by fluorescent-tagged antiscalant. *Crystals*. 2024. Vol. 14, № 7. Article 650. DOI: 10.3390/cryst14070650.
4. Kaushik V., Kumar N., Ghumra D. et al. Investigation of scaling inhibition and biofouling potential of different molecular weight fractions of a PAA antiscalant. *npj Clean Water*. 2024. Vol. 7. Article 36. DOI: 10.1038/s41545-024-00332-7.
5. Yao Y., Ge X., Yin Y. et al. Antiscalants for mitigating silica scaling in membrane desalination : Effects of molecular structure and membrane process. *Water Research*. 2023. Vol. 246. Article 120701. DOI: 10.1016/j.watres.2023.120701.
6. Liu X., Zhang J., Chen Y. et al. Simultaneous adsorption of organic phosphonate and orthophosphate from municipal sewage on nanoparticle  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  with molecular simulation. *npj Clean Water*. 2025. Vol. 8. Article 40. DOI: 10.1038/s41545-025-00453-7.

7. Tkachenko S. V., Trukhina M., Ryabova A. et al. Fluorescent-tagged antiscalants. The new materials for scale inhibition mechanism studies, antiscalant traceability and antiscaling efficacy optimization during  $\text{CaCO}_3$  and  $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  scale formation. *International Journal of Molecular Sciences*. 2023. Vol. 24, № 4. Article 3087. DOI: 10.3390/ijms24043087.

8. Mutke X. A. M., Tavichaiyuth K., Drees F. et al. Oxidation of the nitrogen-free phosphonate antiscalants HEDP and PBTC in reverse osmosis concentrates : Reaction kinetics and degradation rate. *Water Research*. 2023. Vol. 233. Article 119802. DOI: 10.1016/j.watres.2023.119571.

## REFERENCES

1. Karabelas A.J., Mitrouli S.T. and Kostoglou M. Scaling in reverse osmosis desalination plants : A perspective focusing on development of comprehensive simulation tools. *Desalination*. 2024, vol. 474, article 114193. DOI: 10.1016/j.desal.2019.114193.

2. Antony A., Low J.H., Gray S. et al. Scale formation and control in high pressure membrane water treatment systems : a review. *Journal of Membrane Science*. 2011, vol. 383, no. 1-2, pp. 1-16. DOI: 10.1016/j.memsci.2011.08.054.

3. Popov K., Vainer Y., Silaev G. et al. Potential nano/microcenters of crystal nucleation in reagent-grade purity solvents and their differentiation by fluorescent-tagged antiscalant. *Crystals*. 2024, vol. 14, no. 7, article 650. DOI: 10.3390/cryst14070650.

4. Kaushik V., Kumar N., Ghumra D. et al. Investigation of scaling inhibition and biofouling potential of different molecular weight fractions of a PAA antiscalant. *npj Clean Water*. 2024, vol. 7, article 36. DOI: 10.1038/s41545-024-00332-7.

5. Yao Y., Ge X., Yin Y. et al. Antiscalants for mitigating silica scaling in membrane desalination: Effects of molecular structure and membrane process. *Water Research*. 2023, vol. 246, article 120701. DOI: 10.1016/j.watres.2023.120701.

6. Liu X., Zhang J., Chen Y. et al. Simultaneous adsorption of organic phosphonate and orthophosphate from municipal sewage on nanoparticle  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  with molecular simulation. *npj Clean Water*. 2025, vol. 8, article 40. DOI: 10.1038/s41545-025-00453-7.

7. Tkachenko S.V., Trukhina M., Ryabova A. et al. Fluorescent-tagged antiscalants. The new materials for scale inhibition mechanism studies, antiscalant traceability and antiscaling efficacy optimization during  $\text{CaCO}_3$  and  $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  scale formation. *International Journal of Molecular Sciences*. 2023, vol. 24, no. 4, article 3087. DOI: 10.3390/ijms24043087.

8. Mutke X.A.M., Tavichaiyuth K., Drees F. et al. Oxidation of the nitrogen-free phosphonate antiscalants HEDP and PBTC in reverse osmosis concentrates : Reaction kinetics and degradation rate. *Water Research*. 2023, vol. 233, article 119802. DOI: 10.1016/j.watres.2023.119571.

Надійшла до редакції: 27.02.2026.

Прийнято після рецензування: 10.04.2026.

Дата публікації: 29.05.2026.